

## Геометрическая и электронная структура $\text{KTaO}_3\text{:Li}$ : ревизия и расчёты из первых принципов

В.Г. Кузнецов<sup>1</sup>, В.А. Трепаков<sup>1</sup>, А.А. Гавриков<sup>2</sup>, И.И. Тупицын<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 194021 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: kuzvol@mail.ru

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 Санкт-Петербург, Россия

Виртуальные сегнетоэлектрики  $\text{KTaO}_3$  и  $\text{SrTiO}_3$  являются каноническими прототипами семейства широко применяемых функциональных перовскитоподобных  $\text{ABO}_3$  оксидов, модельными объектами физики фазовых переходов и во многом всей физики твёрдого тела благодаря своим уникальным свойствам и поразительному богатству наблюдаемых в них явлений. Одной из ключевых особенностей этих материалов является то, что их свойства могут быть существенно модифицированы и адаптированы внедрением подходящих примесей. По этой причине исследования взаимного влияния примесей и дефектов на свойства материалов и высокополяризуемой матрицы с фазовыми переходами и мягкими Слэтеровскими  $\text{TO1}$  модами на структуру и свойства вводимых примесей, приобретают особый академический и практический интерес. В этом контексте особое место занимает  $\text{KTaO}_3$ , допированный нецентральными ионами  $\text{Li}^+$  (KTL), исследования которого вызывают повышенный интерес, позволяют продвигаться в понимании свойств релаксоров и приводят к обнаружению новых неожиданных свойств, например, выраженной фотопроводимости [1]. При этом несмотря на многочисленность выполненных исследований [2], уровень имеющихся теоретических расчётов KTL требует дальнейшего развития, а полученные результаты, особенно количественные, ревизии.

В настоящей работе представлены обзор имеющихся теоретических исследований KTL, в том числе *ab initio* расчётов [3-5], и выполненные нами более точные первопринципные DFT- расчёты геометрической и электронной структуры KTL, позволяющие получить более надёжные результаты. Вместо использовавшихся ранее функционалов плотности в приближении локальной плотности (LDA) и norm-conserving [3,4] или ultrasoft [5] псевдопотенциалов в наших расчётах были использованы ранее не применявшиеся в расчётах KTL обобщённо-градиентный (GGA) функционал плотности PBEsol и прецизионные PAW-потенциалы (Projected Augmented Waves). Расчёты дефектов проводились в рамках периодической модели и в суперячеечном приближении с расширениями  $2 \times 2 \times 2$  и  $3 \times 3 \times 3$  с использованием базиса плоских волн, как с учётом релаксации решётки в ответ на введение примеси, так и без учёта релаксации. Помимо равновесной геометрии и электронной структуры KTL рассчитывались адиабатические потенциалы (профили потенциалов), в поле которых движется примесный ион  $\text{Li}^+$  в направлениях  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$ , что позволило получить более точные оценки величин энергии надбарьерных перескоков ионов  $\text{Li}^+$ . Предварительные расчёты плотности состояний KTL с прецизионными PAW-потенциалами указывают на существование мелких дефектных уровней в запрещённой зоне, которые не удаётся обнаружить на зонной структуре KTL, рассчитанной для суперячеек с расширениями  $2 \times 2 \times 2$  и  $3 \times 3 \times 3$ , и которые, согласно [1], обуславливают выраженную фотопроводимость допированного литием танталата калия.

Расчёты были выполнены на оборудовании и ПО РЦ «Вычислительный центр СПбГУ».

1. R.S Klein, G.E. Kugel, M.D. Glinchuk, R.O. Kuzian, I.V. Kondakova, *Phys. Rev. B* **50**, 9721 (1994).
2. С.А. Просандеев, В.А. Трепаков, *ЖЭТФ* **121**, 489 (2002).
3. I.I. Tupitsyn, A. Deineka, V. Trepakov, L. Jastrabik, S. Kapphan, *Ferroelectrics* **237**, 9 (2000).
4. I.I. Tupitsyn, A. Deineka, V. Trepakov, L. Jastrabik, S.E. Kapphan, *Phys. Rev. B* **64**, 195111 (2001).
5. S.A. Prosandeev, E. Cockayne, B.P. Burton, *Phys. Rev. B* **68**, 014120 (2003).